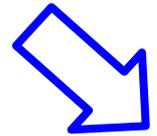
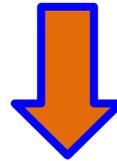


# ВЫВОДЫ

- 1) ПРЕДМЕТОМ** науки о строении вещества являются способы описания реальных объектов посредством сопоставления каждому из них некоторой структурной модели (или совокупности таких моделей) и установление взаимосвязей между свойствами структуры, с одной стороны, и свойствами частиц и взаимодействиями, с другой стороны.
- 2) МЕТОДОМ** науки о строении вещества является конструирование структурных моделей различных типов.

**Основная проблема СТРУКТУРАЛИЗМА**  
— нахождение способов **объективного**  
**описания структурных моделей**  
посредством **количественных**  
**характеристик**



**МЕХАНИЧЕСКИЙ СПОСОБ ОПИСАНИЯ**

---

**Основные понятия МЕХАНИЦИЗМА:**



**НАБЛЮДАЕМАЯ**

**СОСТОЯНИЕ**

**НАБЛЮДАЕМАЯ (величина)** — это некоторое свойство-характеристика исследуемого объекта (структуры или частицы), которое может быть:

- а) **выражено числом** (или несколькими числами),
- б) **измерено экспериментально.**

- 
- измерительный **ПРИБОР**,
  - измерительная **ПРОЦЕДУРА**,
  - измерительный **ЭТАЛОН**.

**МАССА**



- весы
- уравновешивание чашек
- разновесы

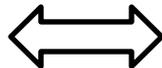
Измерительная процедура — сравнение с эталоном:

$$A = \frac{A_x}{A_{\text{эт}}}$$

**A** — числовое значение наблюдаемой **A**, выраженное относительно выбранного эталона:

$r = 5$  [м];  $m = 5$  [кг];  $E = 5$  [Дж];  $t = 5$  [с] и т.д.

**НАБЛЮДАЕМАЯ**



**ЧИСЛОВОЕ ЗНАЧЕНИЕ**

**Масса = M**  
**(весы)**

**M = 5 [кг]**

## ЧИСЛОВЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

ДОПУСТИМЫЕ

$q = 1; 2; 1000, \dots$

НЕДОПУСТИМЫЕ

$q = 0,12; 3,14, \dots$

**Задача:** найти ВСЕ возможные (допустимые)  
числовые значения некоторой наблюдаемой

$$\mathbf{A} = \{ \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3, \dots, \mathbf{A}_n \}$$

**СПЕКТР**  
наблюдаемой  $\mathbf{A}$

# Типы спектров

## ДИСКРЕТНЫЕ

Пример: электрический заряд  $Q = \{ e, 2e, 3e, \dots, ne \}$

## НЕПРЕРЫВНЫЕ (сплошные)

Пример: расстояние между двумя частицами  $R = \{ 0 — \infty \}$

## СМЕШАННЫЕ (дискретно-непрерывные)

Пример: энергия электрона в атоме — ниже энергии ионизации ( $E < E^*$ ) спектр дискретный, а выше энергии ионизации ( $E > E^*$ ) спектр непрерывный.

**ОГРАНИЧЕННЫЕ** (координата частицы в ящике) и

**НЕОГРАНИЧЕННЫЕ** (координата свободной частицы)

**КОНЕЧНЫЕ** (проекция спина — два допустимых значения) и

**БЕСКОНЕЧНЫЕ** (координата частицы)

# Типы наблюдаемых

**ОПЕРАЦИОННЫЕ** наблюдаемые всегда измеряются непосредственно с помощью приборов:

- масса — с помощью весов,
- длина — с помощью линейки,
- время — с помощью часов и т.д.

**КОНВЕНЦИОНАЛЬНЫЕ** наблюдаемые не измеряются непосредственно, их числовые значения вычисляются по специальным формулам на основании результатов измерений:

- скорость  $v = \Delta x / \Delta t$  или  $v = dx / dt$  ;
- импульс  $p = mv$  ;
- кинетическая энергия  $T = mv^2 / 2$  и т.д.

**ЛОКАЛЬНАЯ** наблюдаемая относится к одной отдельной частице (например, массы атомов в составе молекулы —  $m_1, m_2, \dots$ ).

**ГЛОБАЛЬНАЯ** наблюдаемая относится к структуре в целом (например, масса молекулы —  $M = m_1 + m_2 + \dots$ ).

**ВНЕШНЯЯ** наблюдаемая характеризует внешнюю среду, а **ВНУТРЕННЯЯ** — исследуемый объект.

**ПРОСТАЯ** наблюдаемая выражается одним числом:

$$m = 5 \text{ кг} ; E = 10 \text{ Дж}$$

**СЛОЖНАЯ** наблюдаемая выражается несколькими числами:

$$\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$$

**Векторный тип**

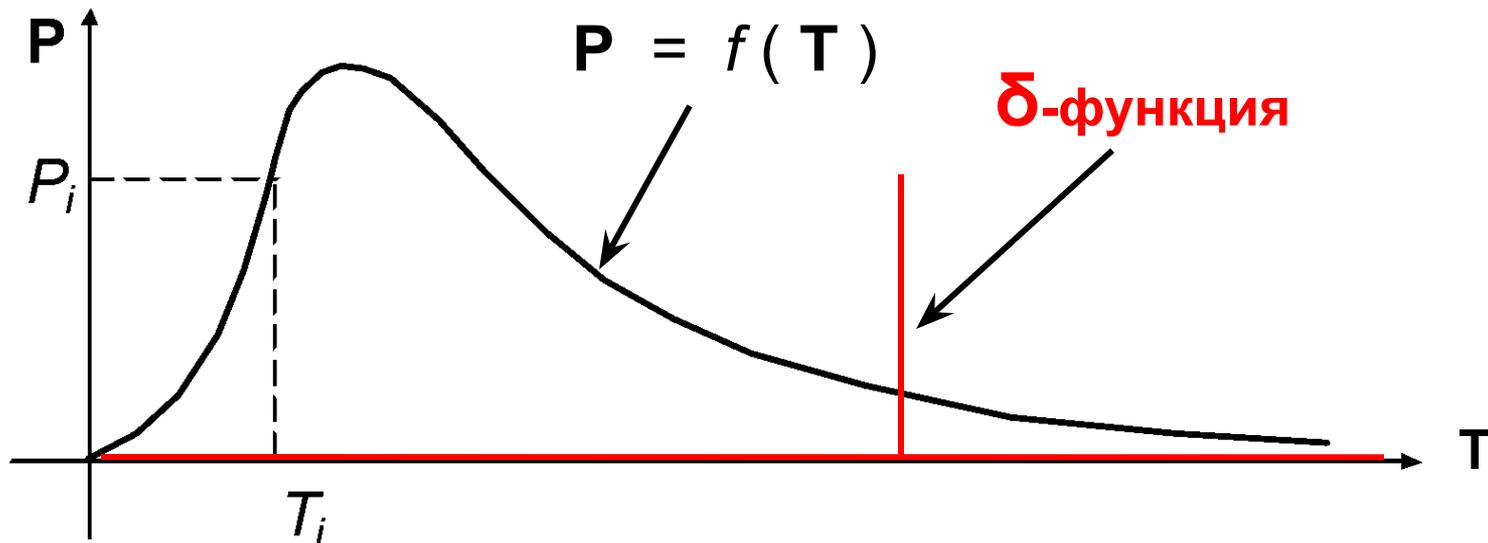
$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix}$$

**Тензорный тип**

# Функции распределения

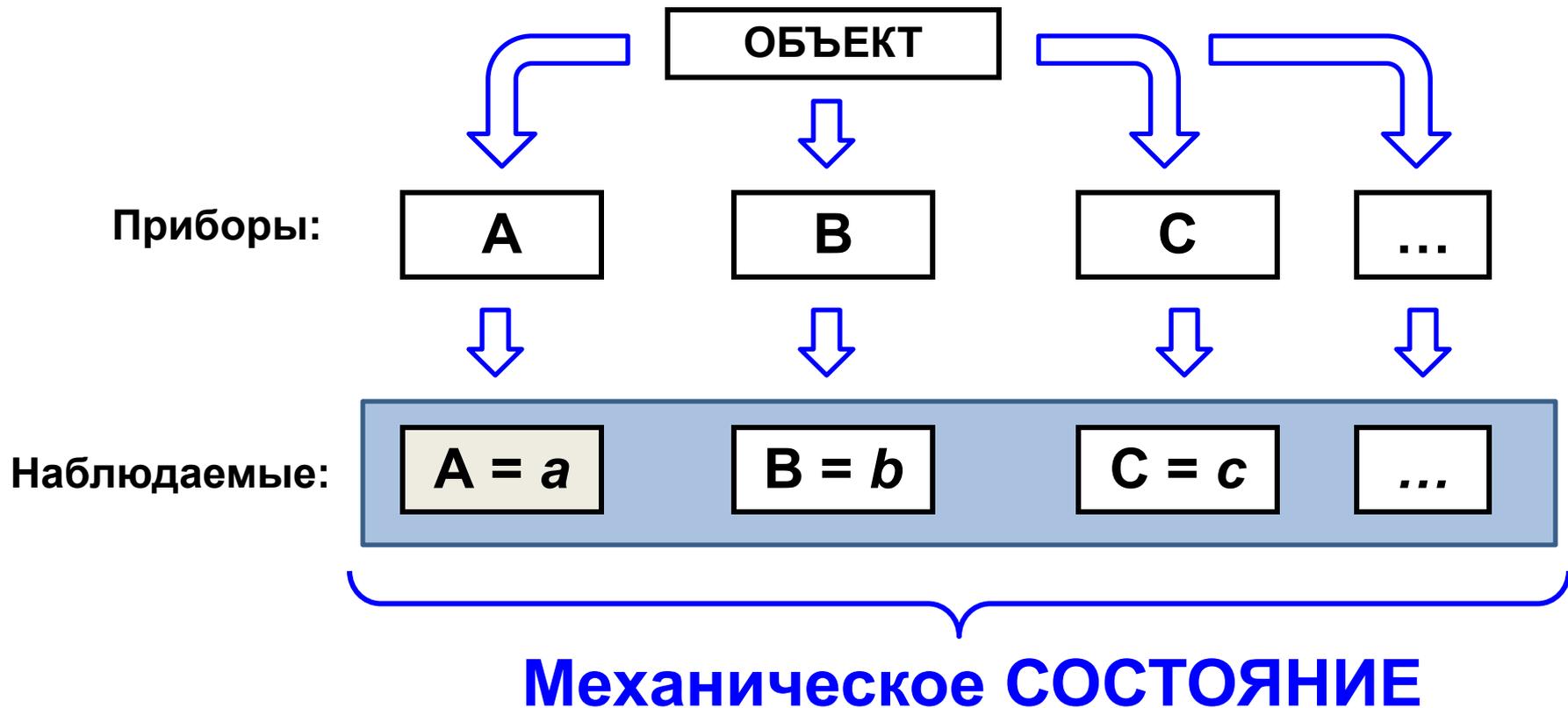
КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ молекулы:  $T_1, T_2, T_3, \dots$

$$\mathbf{T} = \left\{ \begin{array}{l} T_1, T_2, T_3, \dots \\ P_1, P_2, P_3, \dots \end{array} \right\} \quad (P \text{ — вероятности})$$

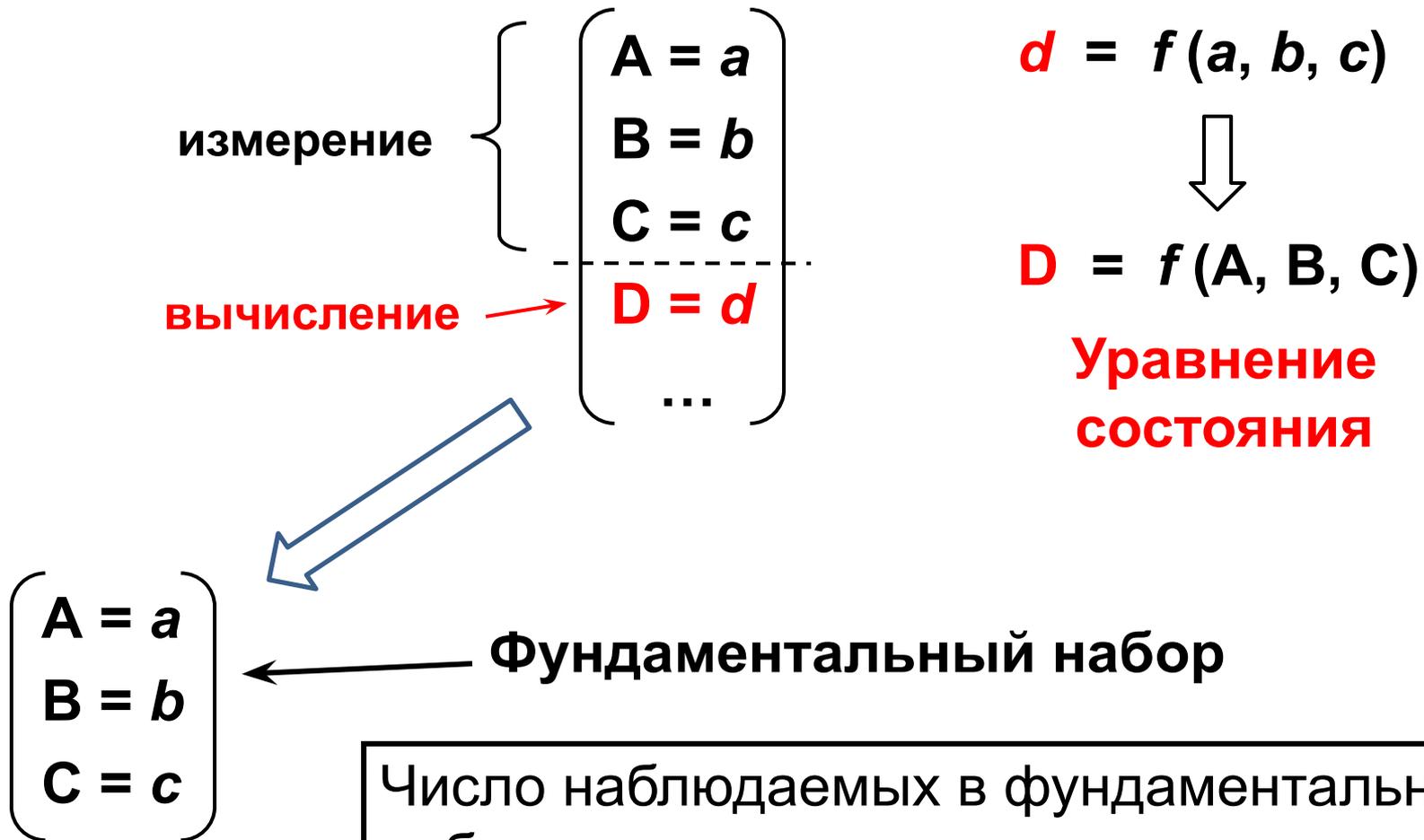


# СОСТОЯНИЕ

**Задача:** дать исчерпывающее механическое описание объекта (частицы или структуры)



# Уравнения состояния



Число наблюдаемых в фундаментальном наборе,  $r$  — **число механических степеней свободы**

Пример: система, содержащая 1 моль идеального газа

Уравнения состояния:  $P = RT / V$ ;  $V = RT / P$ ;  $T = PV / R$

Фундаментальные наборы:  $(P, V)$ ;  $(P, T)$ ;  $(V, T)$ ; ...

Число степеней свободы:  $r = 2$

## Условие одновременности

Время	Энергия	Импульс
$t_1$	$T_1$	$p_1$
$t_2$	$T_2$	$p_2$
...	...	...

$$T_1 = p_1^2 / 2m$$

$$T_2 = p_2^2 / 2m$$

НО

$$T_1 \neq p_2^2 / 2m$$

$$T_2 \neq p_1^2 / 2m$$

# Вектор состояния

$$\Phi = \begin{pmatrix} A = a \\ B = b \\ C = c \end{pmatrix}$$

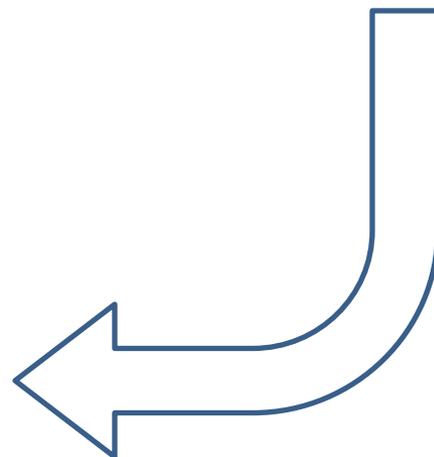
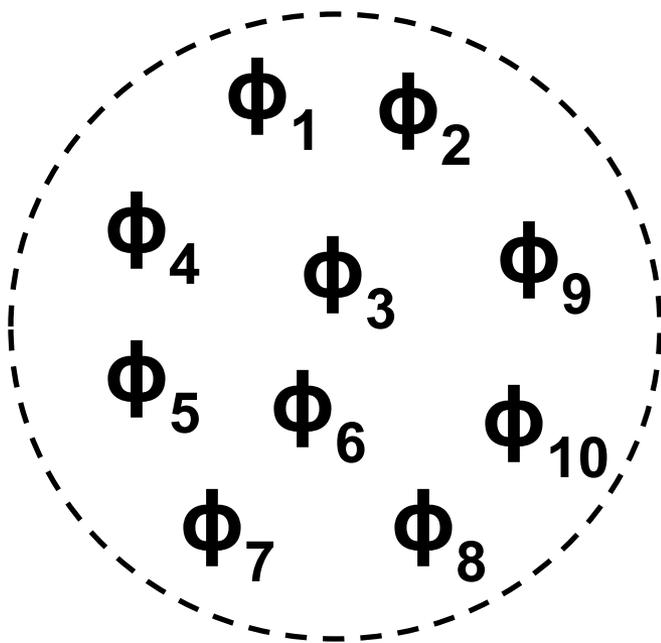
**СОСТОЯНИЕ**



$$\phi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

**БАЗИС**  
↓  
(A, B, C)

**ВЕКТОР состояния**



**ПРОСТРАНСТВО  
СОСТОЯНИЙ**

(максимально подробное  
механическое описание системы)

**ПРОСТРАНСТВО СОСТОЯНИЙ**



**Вектор состояния**



**СОСТОЯНИЕ**



**Наблюдаемые**



**Числовые  
значения**

**Основные понятия механицизма**

# Принцип суперпозиции

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix}_{(A,B,C)}$$

$$\Phi_2 = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{pmatrix}_{(A,B,C)}$$

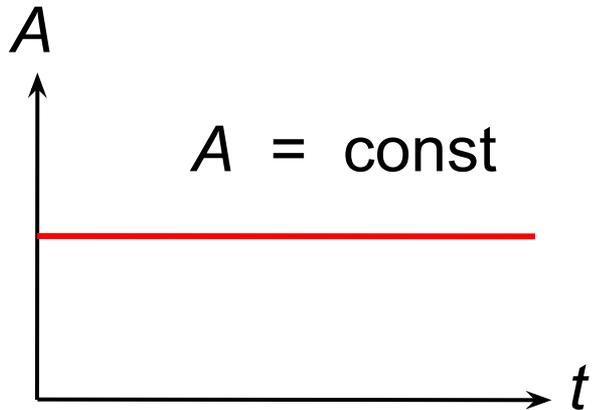
$$\Phi_3 = \alpha \cdot \Phi_1 + \beta \cdot \Phi_2$$

$$= \alpha \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix} + \beta \cdot \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \cdot a_1 + \beta \cdot a_2 \\ \alpha \cdot b_1 + \beta \cdot b_2 \\ \alpha \cdot c_1 + \beta \cdot c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

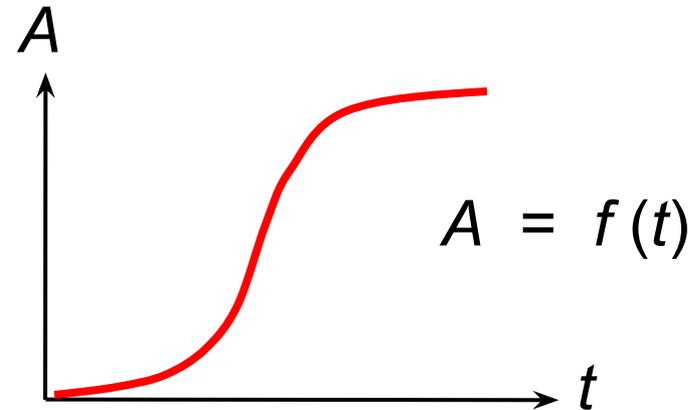
## Примеры пространств состояний:

- **Конфигурационное пространство** (3-х мерное) с координатными осями  $x, y, z$  (если имеется  $N$  частиц, то размерность равна  $3N$ );
- **Галилеево пространство** (4-х мерное), в котором к пространственным осям добавлена временная —  $x, y, z, t$ ;
- **Фазовое пространство** (6-и мерное), в котором кроме трех пространственных осей имеются еще три оси для скоростей или импульсов —  $x, y, z, v_x, v_y, v_z$  (если имеется  $N$  частиц, то размерность равна  $6N$ );
- **Гильбертово пространство** квантовой механики (бесконечномерное), где в качестве координатных осей служат некоторые специальные состояния, например, стационарные;
- **Пространство составов** (с переменной размерностью), в котором координатным осям соответствуют чистые химические вещества, а векторам — смеси;
- **Элементное пространство** (с переменной размерностью), в котором координатным осям соответствуют химические элементы, а векторам — химические соединения.

# ЭВОЛЮЦИЯ механических состояний



**СТАЦИОНАРНОЕ  
состояние**



**ЭВОЛЮЦИОНИРУЮЩЕЕ  
(нестационарное)  
состояние**

$$\left. \begin{aligned} A &= f(t) \\ B &= g(t) \\ C &= h(t) \end{aligned} \right\}$$

.....  
.....

**Уравнения эволюции**



# Примеры уравнений эволюции

Ньютона: 
$$\frac{dp_i}{dt} = m \cdot \frac{d^2q_i}{dt^2} = f_i$$

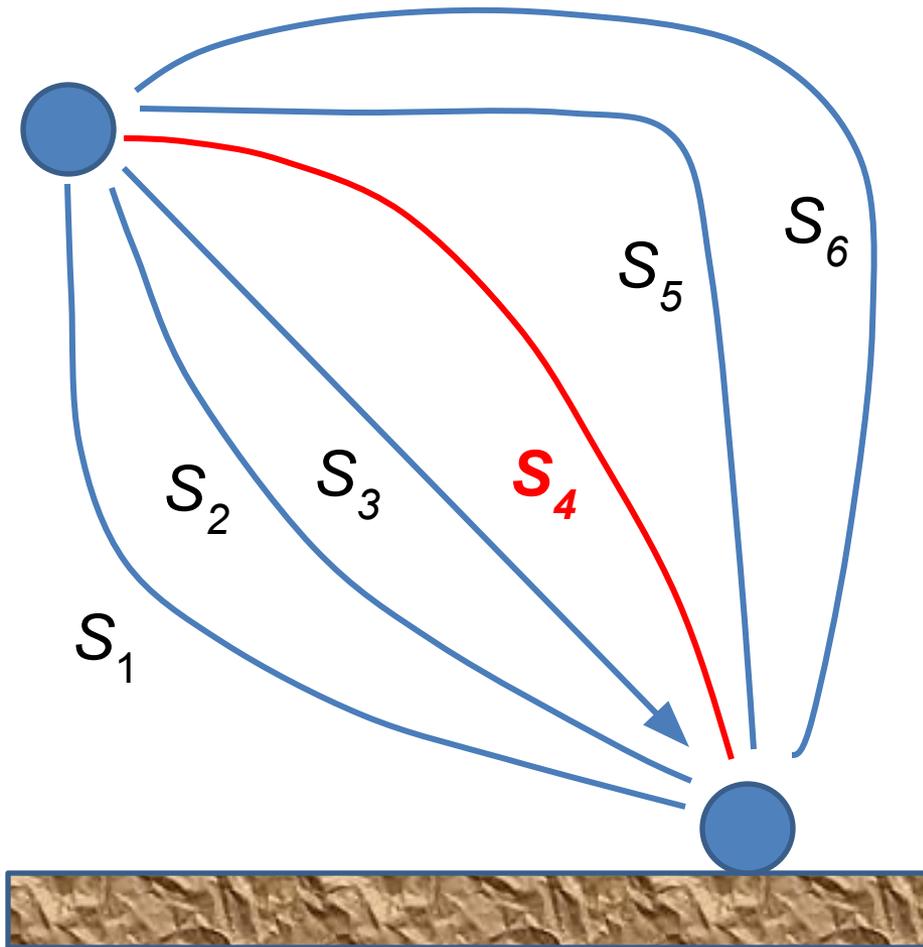
Лагранжа: 
$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial q} = 0$$

**L = T - U**  
функция  
Лагранжа

Гамильтона: 
$$\dot{p}_i = - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial q_i} \quad \dot{q}_i = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p_i}$$

**H = T + U**  
функция  
Гамильтона

# Принцип наименьшего действия



Реальная  
траектория

$$S = \min$$

# Принцип суперпозиции

Любой сложный процесс эволюции ( $\mathcal{E}$ ) может быть представлен в виде суперпозиции некоторых элементарных процессов ( $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \dots$ ), описание которых известно и отличается особенной простотой:

$$\mathcal{E} = C_1 \cdot \mathcal{E}_1 + C_2 \cdot \mathcal{E}_2 + \dots$$

## Примеры элементарных процессов:

- **трансляция** (равномерное движение по прямой),
- **вращение** (равномерное движение по окружности),
- **гармоническое колебание** и др.

Произвольная трансляция:  $T = \alpha \cdot T_x + \beta \cdot T_y + \gamma \cdot T_z$

Произвольное вращение:  $R = \alpha \cdot R_x + \beta \cdot R_y + \gamma \cdot R_z$

Движение по спирали:  $S = \alpha \cdot T + \beta \cdot R$

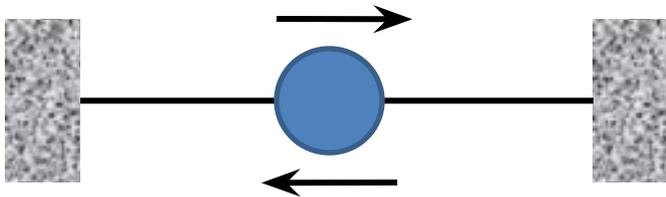
# Циклические движения

Движение частиц в структурах конечных размеров (атомы, молекулы и др.) носит **ЦИКЛИЧЕСКИЙ** характер

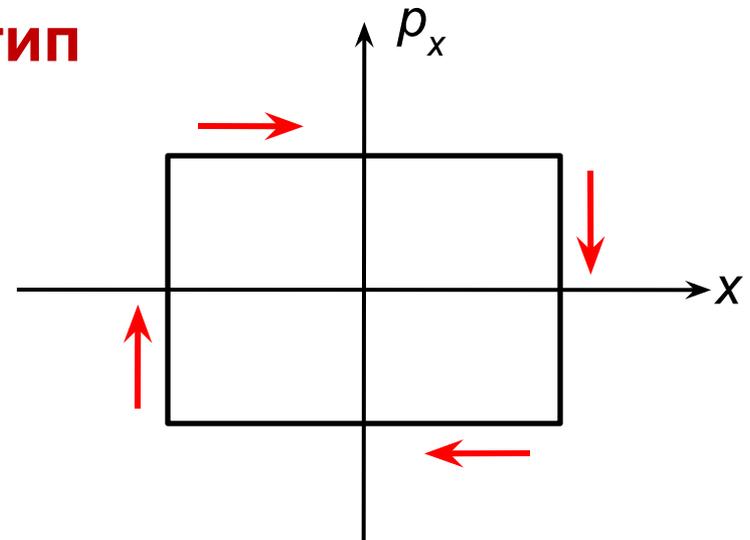


Для представления циклических движений необходимы элементарные движения циклического типа

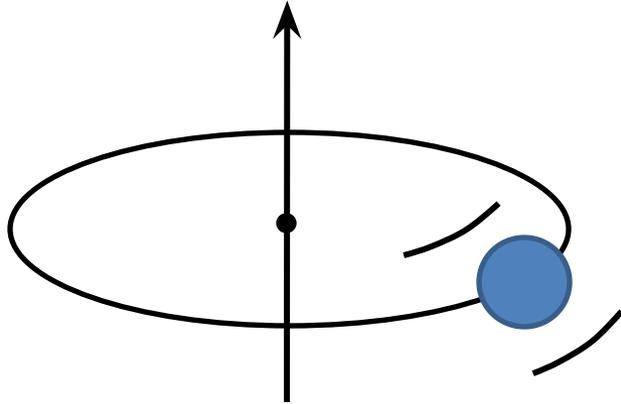
## Возвратно-поступательный тип



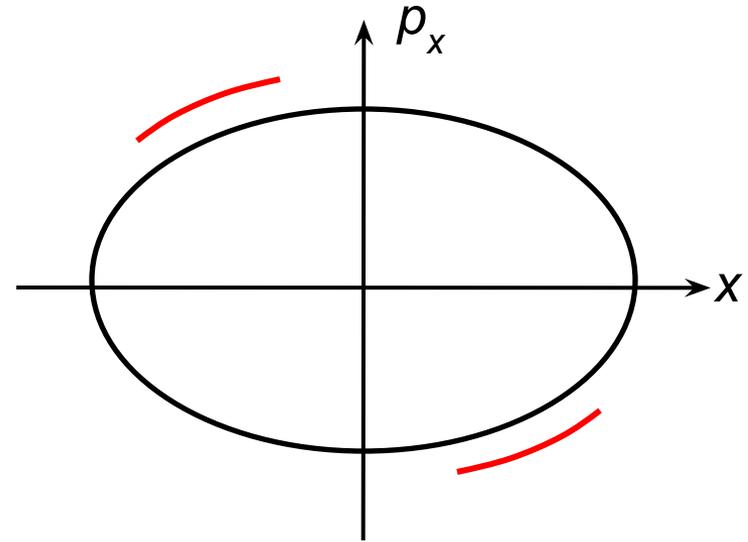
«Одномерный  
потенциальный ящик»



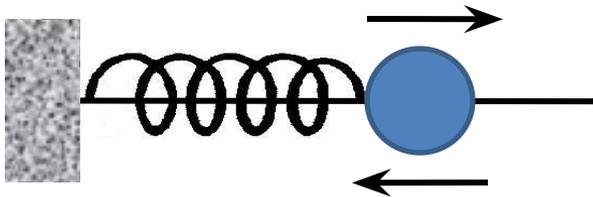
## Вращательный тип



«Плоский ротатор»



## Колебательный тип



«Одномерный осциллятор»

### Инварианты:

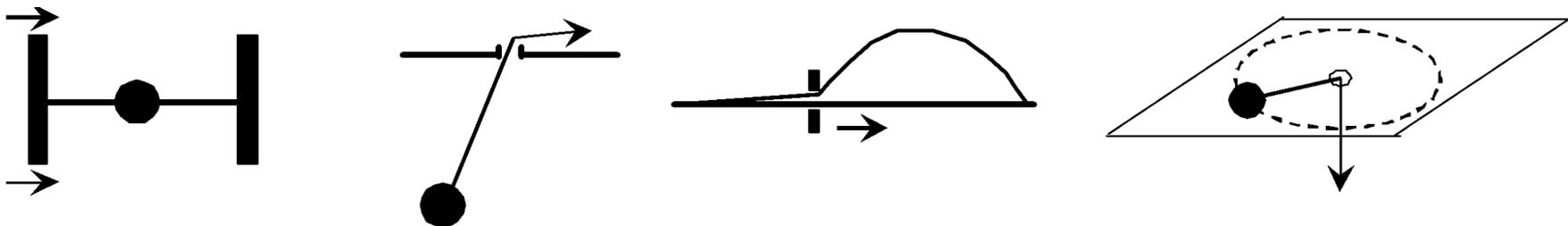
$A$  — амплитуда

$\omega$  — частота

$$x = A \cdot \cos(\omega t + \phi_0)$$

Фаза  $\phi = \omega t + \phi_0$

# Адиабатический инвариант



медленное изменение размера устройства



изменение энергии  $E$  (импульса) и частоты  $\omega$

$E / \omega = I = \text{const}$  — адиабатический инвариант

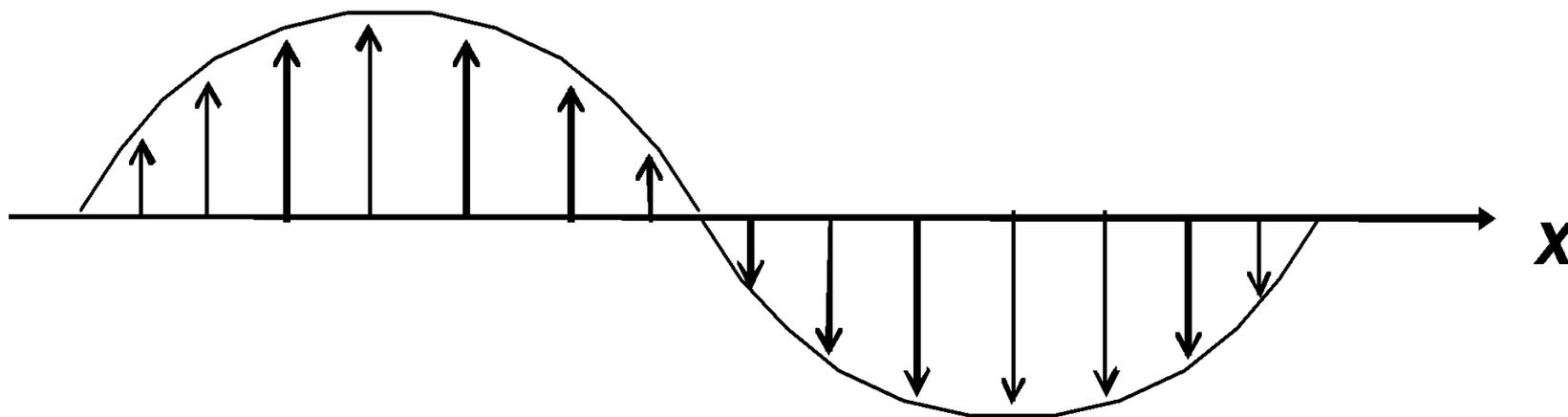
Одномерный ПЯ размера  $L$

$$L \rightarrow L' = L/2 \quad \Rightarrow \quad v \rightarrow v' = 2v$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega' \sim v'/L' \sim (2v)/(L/2) = 4\omega \\ E' \sim (v')^2 \sim (2v)^2 = 4E \end{array} \right.$$

# Составные модели

«Волна» как совокупность одномерных осцилляторов

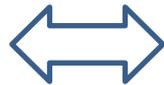


$$\phi = \omega \cdot t - k \cdot x$$

( $k$  — волновой вектор)

# ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ в механическом способе описания

Сила,  $F_q$



Потенциальная энергия,  $U$

$$F_q = -\frac{dU}{dq}$$

$$U = \int F_q dq$$

Принцип суперпозиции

$$F = C_1 \cdot F_1 + C_2 \cdot F_2 + \dots$$

$$U = C_1 \cdot U_1 + C_2 \cdot U_2 + \dots$$

# Фундаментальные (базисные) взаимодействия

**ЦВЕТОВЫЕ**, действующие между частицами, обладающими т.н. "цветовым зарядом" ("цветом")

**ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ**, действующие между частицами, обладающими "электрическим зарядом"

**ГРАВИТАЦИОННЫЕ**, действующие между частицами, обладающими "гравитационным зарядом" ("массой")

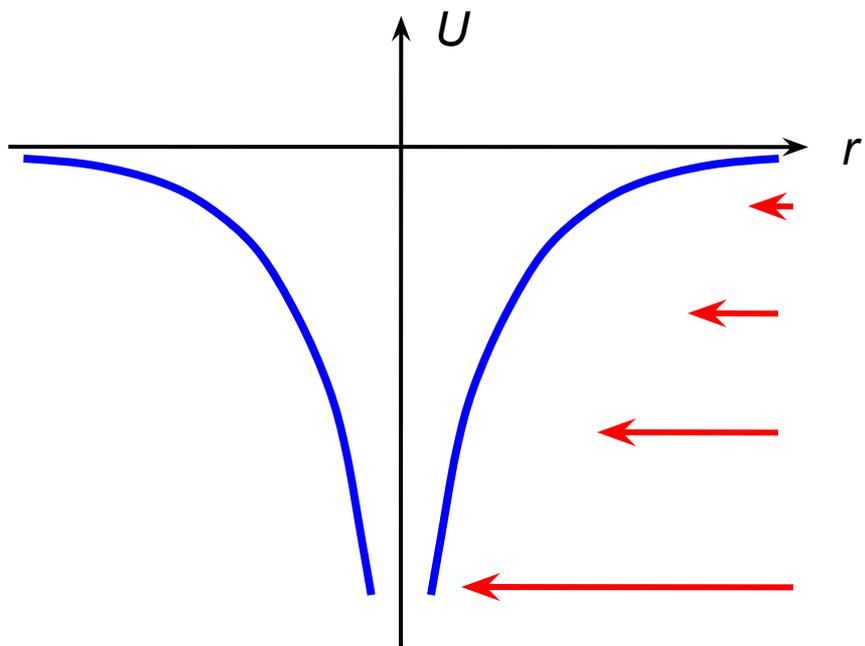
# Особенности фундаментальных сил

**ДАЛЬНОДЕЙСТВИЕ:** ФС действуют на любых расстояниях, хотя их величина зависит от расстояния между взаимодействующими частицами.

**НЕНАСЫЩАЕМОСТЬ:** с одной выделенной частицей посредством ФС могут взаимодействовать любое число других частиц. При этом величина ФС для данной пары частиц не зависит от наличия или отсутствия других частиц.

**ИЗОТРОПНОСТЬ:** величина ФС не зависит от взаимной ориентации частиц в пространстве, а определяется только расстоянием между ними.

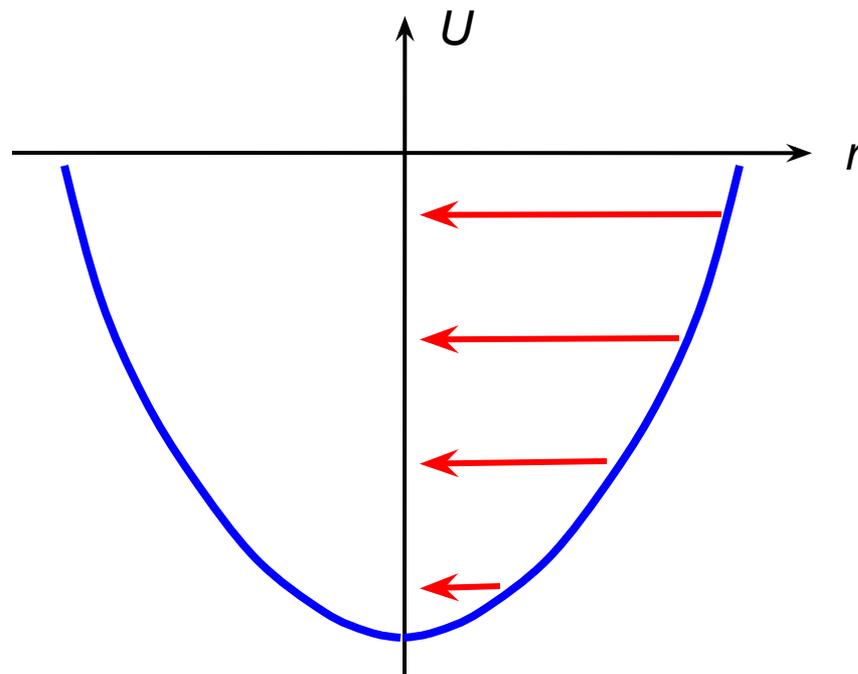
# Электромагнитные и гравитационные взаимодействия



$$U \sim r^{-1}$$

$$F \sim r^{-2}$$

# Цветовые взаимодействия



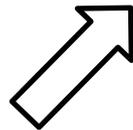
$$U \sim r^\alpha$$

$$F \sim r^\beta$$

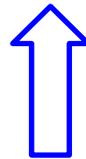
# Динамический характер взаимодействий

## Электромагнитные взаимодействия двух точечных электрических зарядов

$$F = F_{\text{Э}} + F_{\text{М}} + F_{\text{ЭМ}}$$



Зависит  
только от  
расстояния



Зависит от  
расстояния  
и скорости



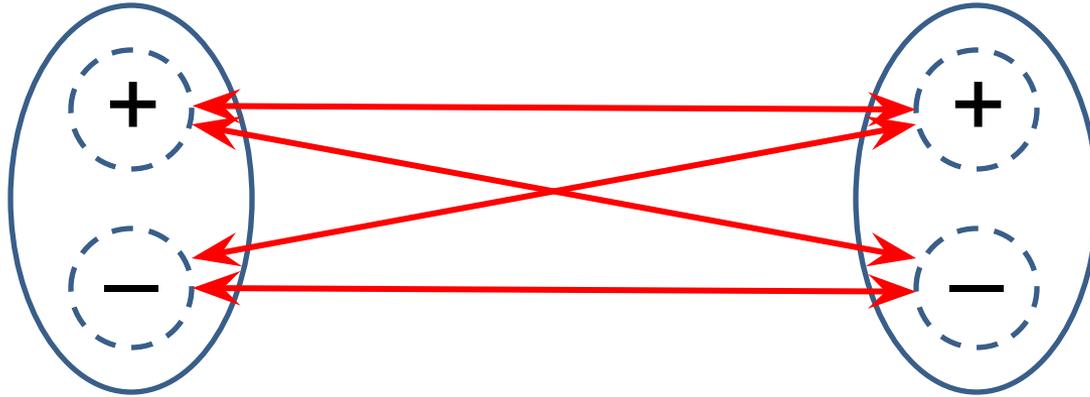
Зависит от  
расстояния  
и ускорения

**КУЛОНОВСКОЕ**  
взаимодействие

**МАГНИТНОЕ**  
взаимодействие

**ФОТОННОЕ**  
взаимодействие

# Остаточные взаимодействия



$$F = F_{++} + F_{+-} + F_{-+} + F_{--}$$

$$-0,2 = -10 + 9,9 + 9,9 - 10$$

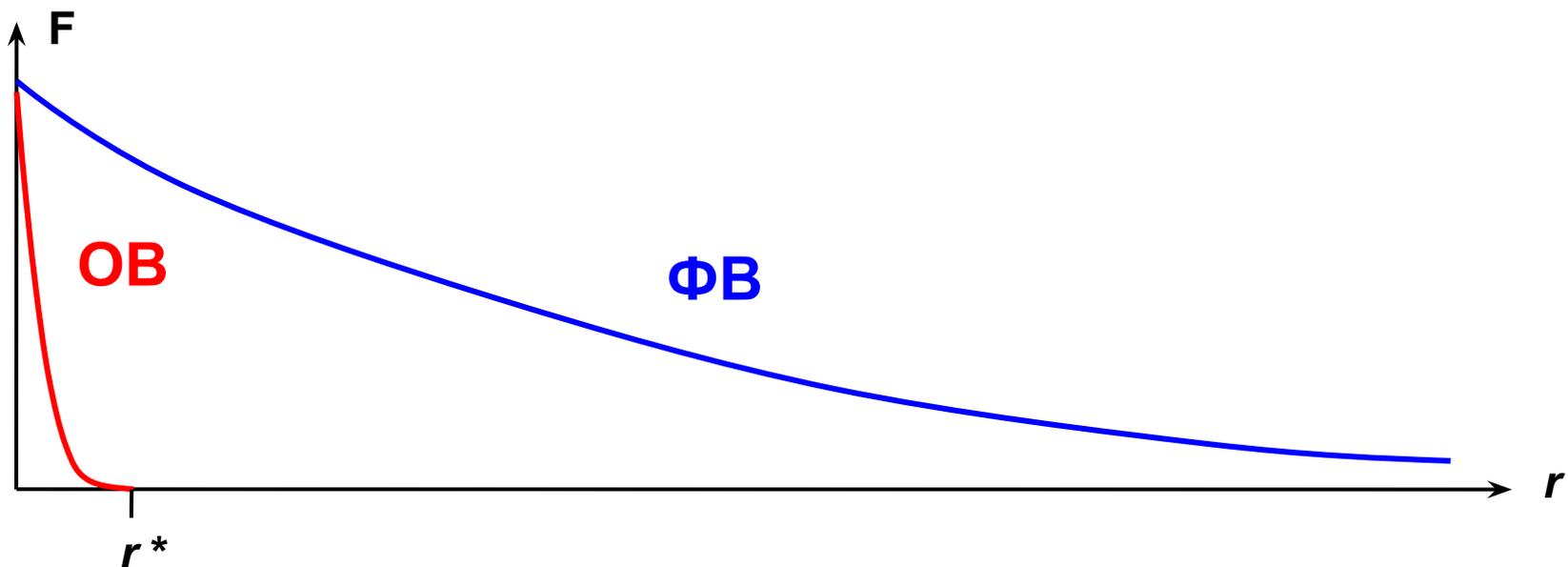


«остаток»

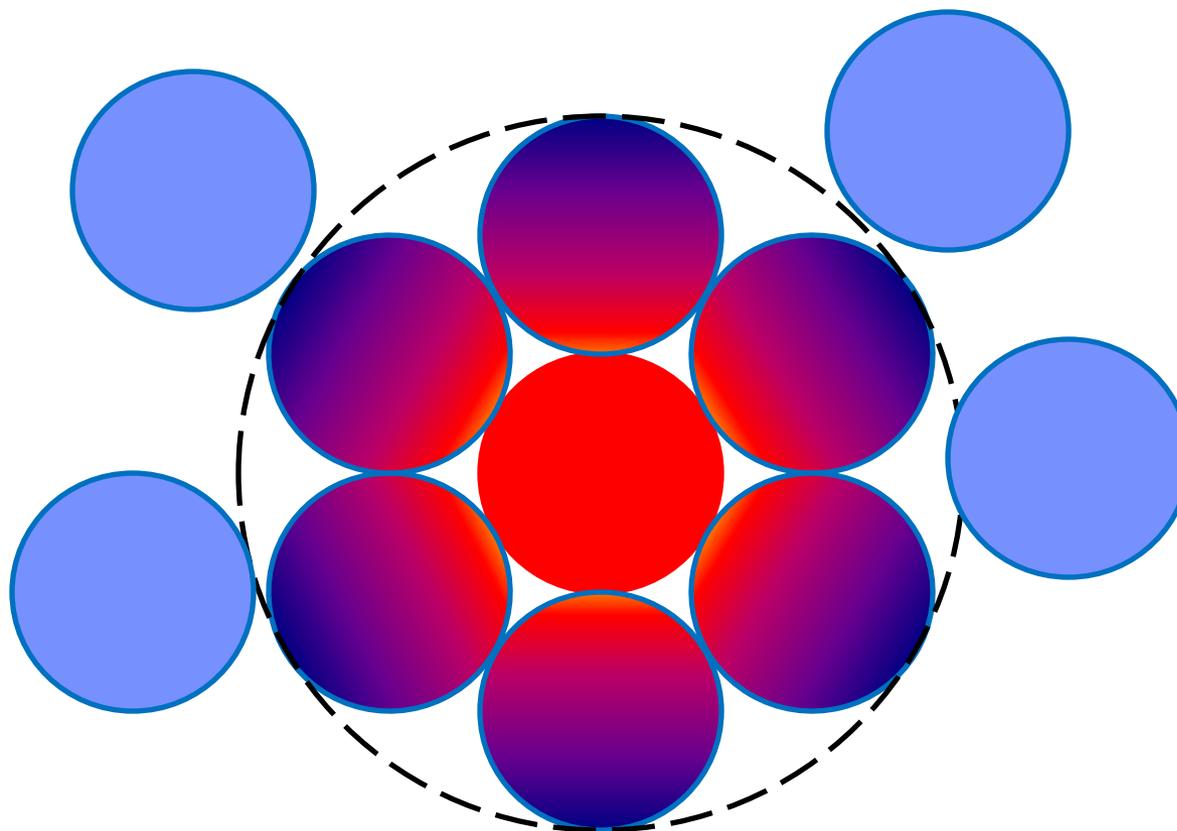
# Особенности остаточных взаимодействий

**КОРОТКОДЕЙСТВИЕ:** на больших расстояниях силы притяжения и отталкивания практически полностью компенсируют друг друга (можно ввести «радиус действия»  $r^*$ , на котором интенсивность взаимодействий становится пренебрежимо малой).

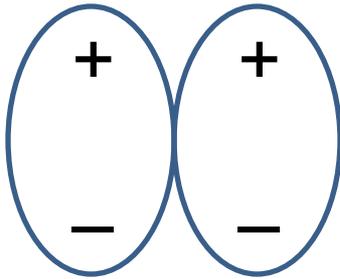
Например, химические взаимодействия между нейтральными атомами (ковалентные связи) имеют  $r^* \approx 1-2 \text{ \AA}$ .



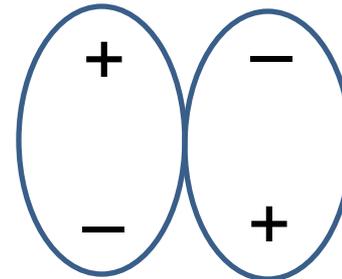
**НАСЫЩАЕМОСТЬ:** любая мультипольная структура может взаимодействовать только с ограниченным числом ( $n$ ) других аналогичных структур (теми, которые могут поместиться внутри сферы радиуса  $r^*$  (для химических взаимодействий  $n < 13$ )).



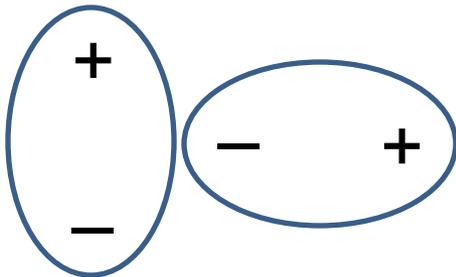
**НЕИЗОТРОПНОСТЬ (тензорный характер):** величина ОС между двумя мультиполями существенно зависит от их взаимной ориентации.



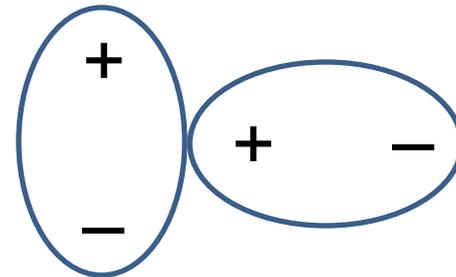
Отталкивание,  $F < 0$



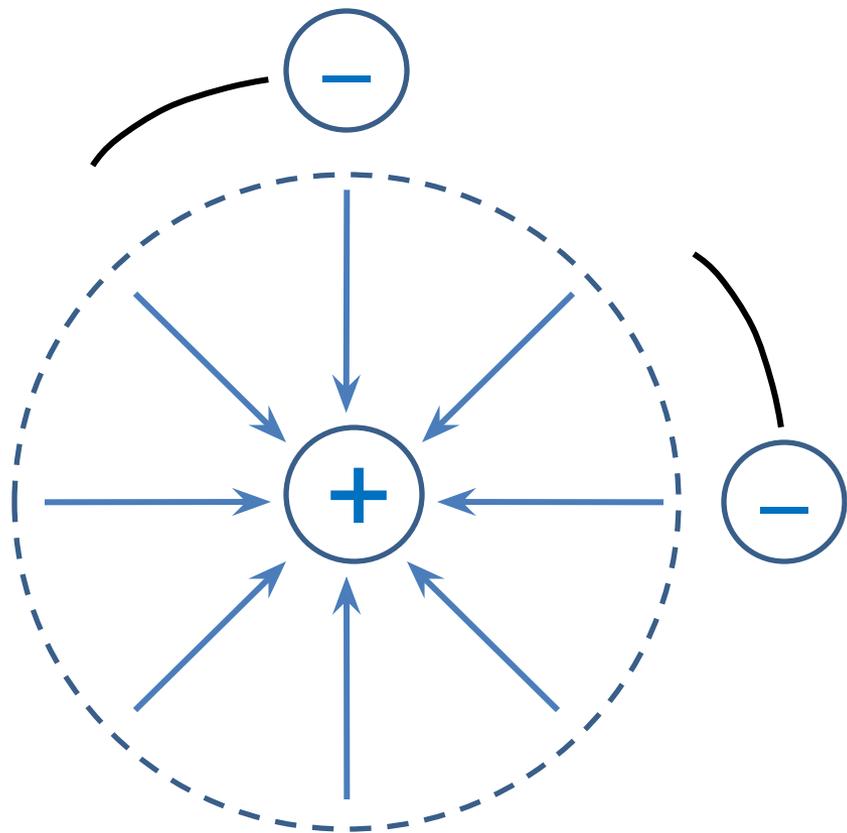
Притяжение,  $F > 0$



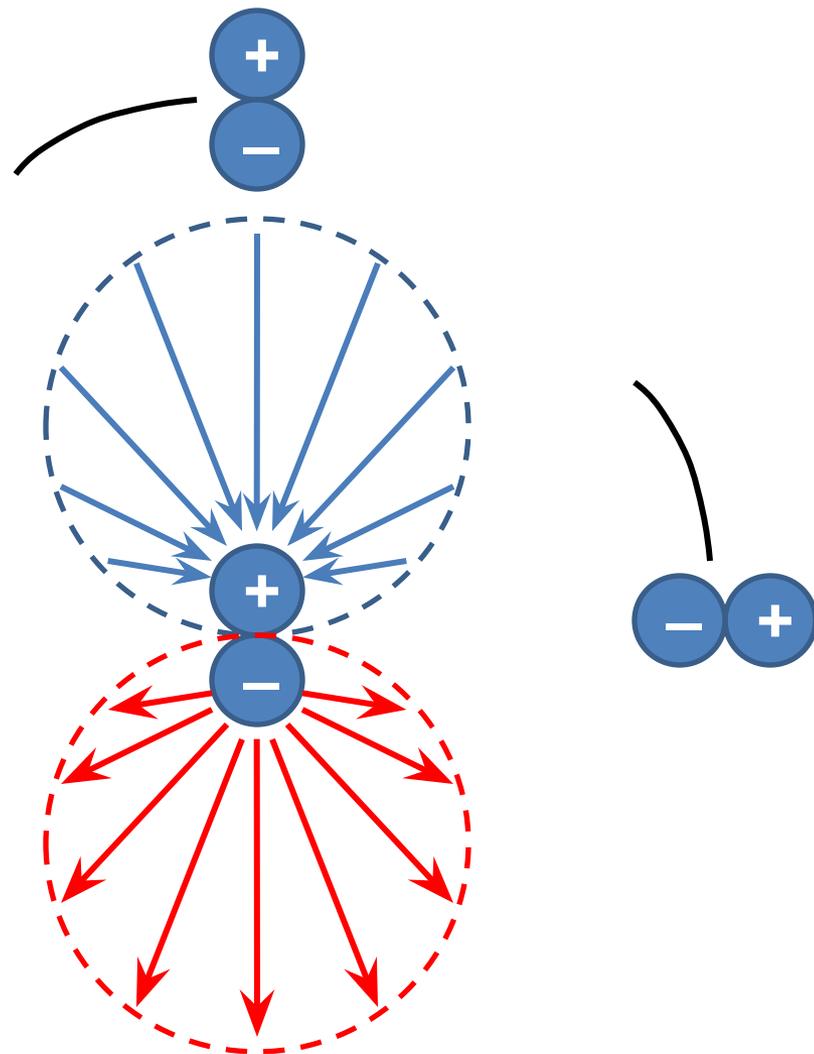
$F = 0$



$F = 0$



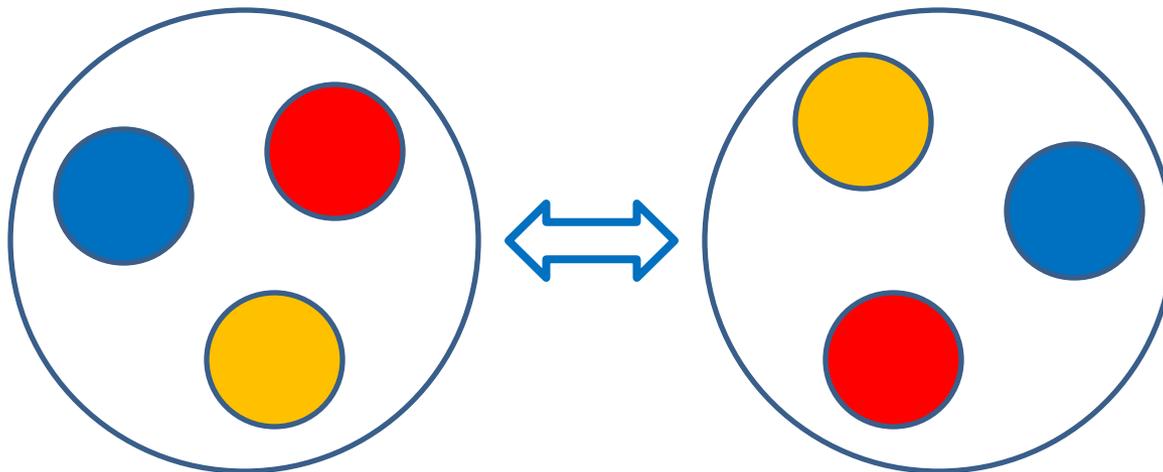
**ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ  
взаимодействие**



**ОСТАТОЧНОЕ  
(диполь-дипольное)  
взаимодействие**

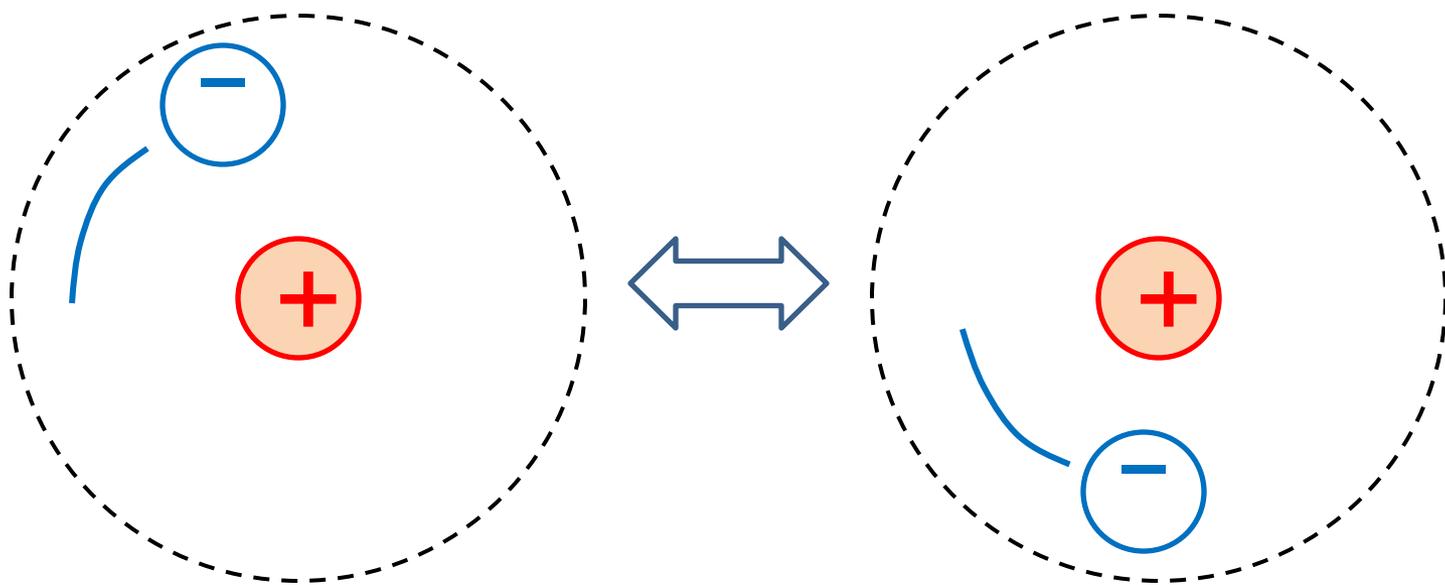
# Примеры остаточных взаимодействий

ЯДЕРНЫЕ силы (остаток цветовых сил между нуклонами в атомном ядре)



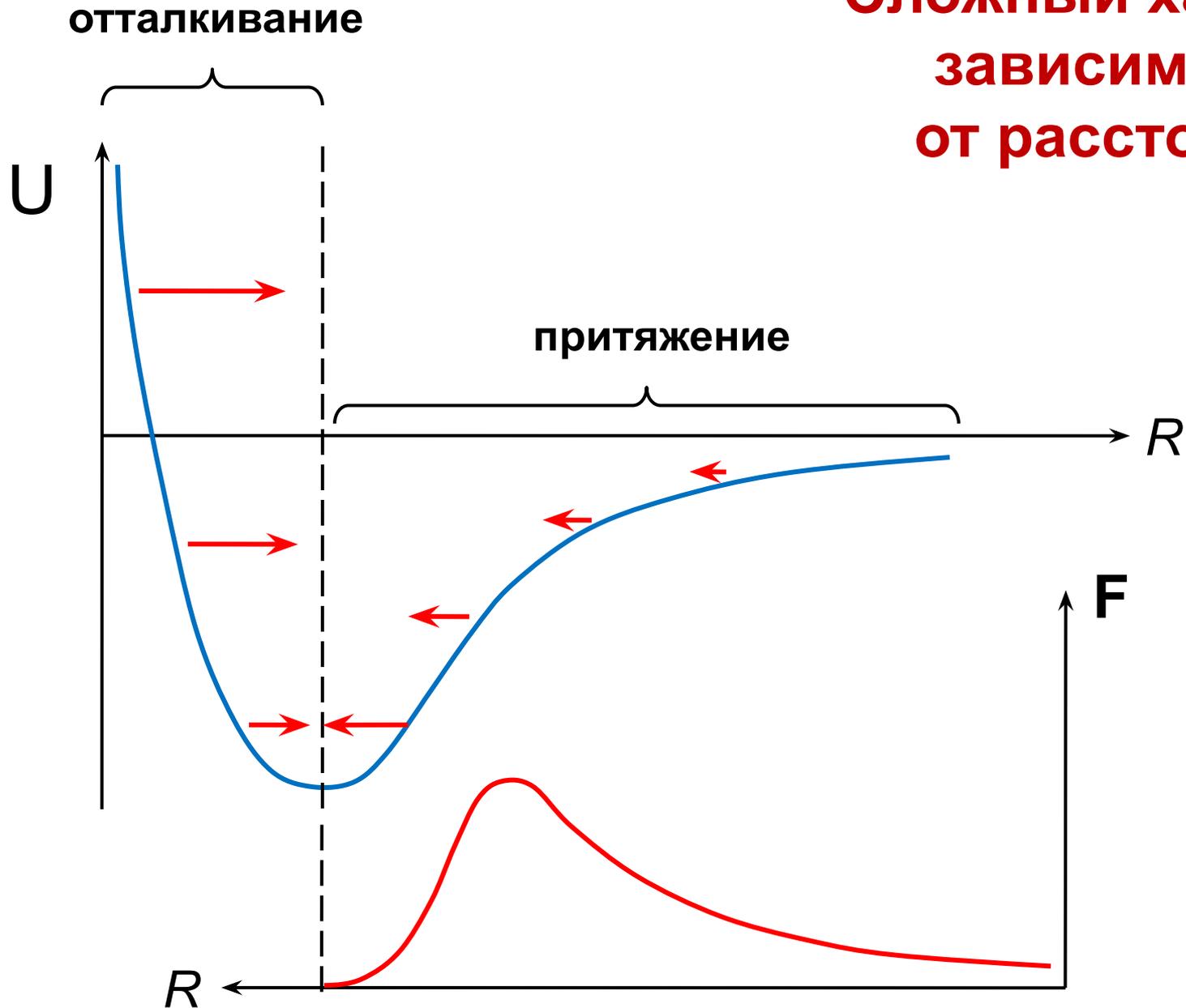
$$F_{n-n} = + (F_{кж} + F_{кс} + F_{жк} + F_{жс} + F_{ск} + F_{сж}) - (F_{кк} + F_{жж} + F_{сс})$$

# ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ (остаток электромагнитных сил между электронами и ядрами атомов в составе молекулы)



$$F_{\text{H-H}} = + (F_{+-} + F_{-+}) - (F_{++} + F_{--})$$

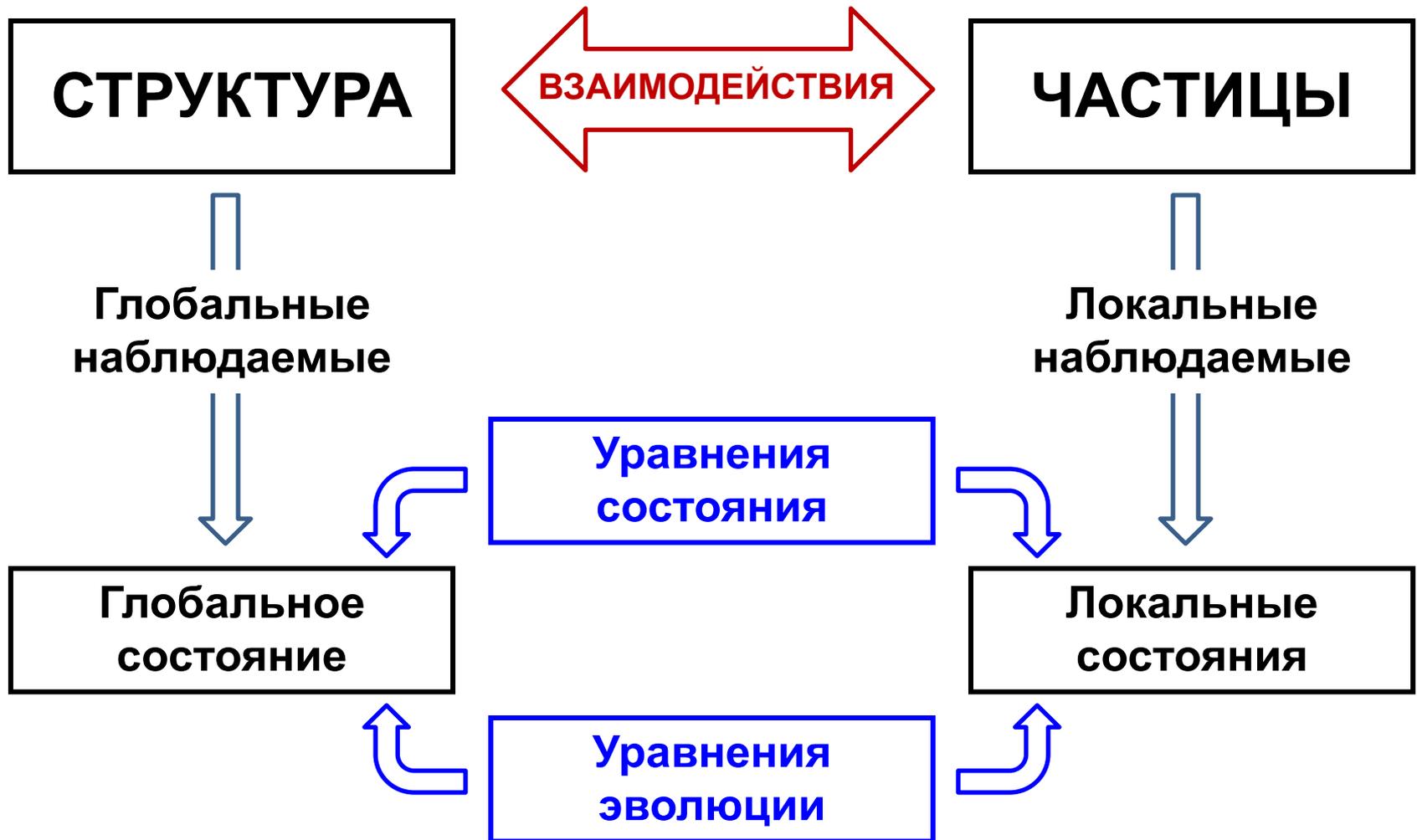
# Сложный характер зависимости от расстояния



# **Дополнительные примеры остаточных электромагнитных взаимодействий**

- **Ван-дер-Ваальсовы силы**
- **КАПИЛЛЯРНЫЕ силы**
- **АДГЕЗИОННЫЕ силы**
- **Силы ТРЕНИЯ**

# Логическая структура механицизма



**ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ**

**СТРУКТУРА**

**ЧАСТИЦЫ**

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

**СИЛЫ**

Глобальные  
наблюдаемые

Локальные  
наблюдаемые

**Уравнения  
состояния**

**Глобальное  
состояние**

**Локальные  
состояния**

**Уравнения  
эволюции**

# Математические модели в механизме

Наблюдаемая	↔	Число (вектор, тензор, ФР)
Состояние	↔	Вектор состояния
Взаимозависимость наблюдаемых	↔	Уравнение состояния
Совокупность всех состояний объекта	↔	Векторное пространство состояний
Фундаментальный набор	↔	Базис ПС
Число степеней свободы	↔	Размерность ПС и векторов состояния
Взаимодействие	↔	Векторное поле сил
Взаимодействие	↔	Поверхность потенциальной энергии